



УДК 669.187.2:548.75

М. И. Гасик /д. т. н./, Ю. С. Пройдак /д. т. н./,
А. П. Горобец /к. т. н./Национальная металлургическая академия
Украины, г. Днепро, Украина
e-mail: tehnosplavy@ua.fm;
projdak@metal.nmetau.edu.ua
ООО «ИНТЕРПАЙП УКРАИНА», г. Днепро,
Украина
e-mail: Gennadiy.Yesaulov@interpipe.biz;
Yuriy.Klimchik@interpipe.biz

Г. А. Есаулов /к. т. н./, Ю. В. Климчик

ИК-спектроскопическое исследование кристаллохимической структуры и плавкости щелочного алюмосиликата (пегматита) как компонента ТШМ для внепечной обработки электростали с замещением импортного плавикового шпата

М. I. Gasik /Dr. Sci. (Tech.)/,
Yu. S. Projdak /Dr. Sci. (Tech.)/,
A. P. Gorobets /Cand. Sci. (Tech.)/National Metallurgical Academy of Ukraine, Dnipro,
Ukraine
e-mail: tehnosplavy@ua.fm;
projdak@metal.nmetau.edu.ua
INTERPIPE UKRAINE LLC, Dnipro, Ukraine
e-mail: Gennadiy.Yesaulov@interpipe.biz;
Yuriy.Klimchik@interpipe.bizG. A. Yesaulov /Cand. Sci. (Tech.)/,
Y. V. Klimchik

IR-spectroscopic study of crystal-chemical structure and fusibility of alkaline aluminium silicate (pegmatite) as a component of solid slag-forming material for secondary metallurgy of electric furnace steel with replacement of imported flourspar

Цель. Анализ информационного ресурса данных о составе и свойствах щелочных алюмосиликатов и экспериментальное исследование минерального состава кристаллохимической структуры и плавкости пегматита как природного сырья, используемого при внепечной обработке электростали в составе ТШМ взамен импортного плавикового шпата.

Методика. Аналитическая часть исследования включает метод обобщения и анализа литературных данных о кристаллических структурах и свойствах щелочных алюмосиликатов, а методика экспериментальной части является логическим продолжением выполнения сформулированной цели, а именно: регистрации методом инфракрасной спектроскопии ИК-спектрами на спектрометре Nicolet iS10 с программным обеспечением и операционной системой.

Результаты. Получены и проанализированы ИК-спектрограммы поглощения электромагнитного излучения пегматита Елисеевского месторождения, представляющие собой сложные кривые в координатах «интенсивность поглощения – волновые числа» с большим числом максимумов. Результаты обработки в автоматическом режиме работы на ИК-спектрометре при помощи программного обеспечения и представляют большой научный и практический интерес.

Научная новизна. В ИК-спектрах елисеевского пегматита впервые получены превалирующие интенсивные полосы, характерные для тетраэдров SiO_4 силикатов. Большой сдвиг диапазона симметричных валентных колебаний мостиковых связей $\text{Si} - \text{O} - \text{Si}$ подтверждает полимеризацию кислородных мотивов, что свойственно каркасным силикатам: кварцу, полевым шпатам и др. Пик (экстремум) 950 см^{-1} принадлежит прежде всего валентным колебаниям $\text{Si} - \text{O} - \text{Al}$, где алюминий входит в анионный радикал. Вследствие изоморфного замещения групп $[\text{SiO}_4]$ группами $[\text{AlO}_4]$ каркасы типа $[\text{SiO}_2]$ превращаются в каркасы алюмосиликатов с внесением в единицу структуры добавочного отрицательного заряда. В пегматите содержатся ионы щелочных металлов, например, Na^+ , который входит с одним ионном Al^{3+} и нейтрализует

ет структуру в целом. Наряду с этими результатами получены и проанализированы полосы поглощения, соответствующие валентным колебаниям концевых групп – O – Si – O –, свободным деформационным колебанием концевых силанольных групп. Валентные колебания гидроксидов молекул воды на поверхности представлены на ИК-спектрограмме диффузным пиком.

Практическая значимость. Результаты экспериментального исследования, их обобщение и анализ в сочетании с данными информационного ресурса об ИК-спектроскопии (колебательными и спектрам поглощения электромагнитного излучения) использованы при разработке механизма и термокинетики ассимиляции пегматита высокоосновными шлаками при разработке инновационной технологии внепечной обработки электростали с замещением импортного плавикового шпата отечественным сырьевым материалом – щелочным алюмосиликатом елисеевским пегматитом. (Ил. 4. Табл. 2. Библиогр.: 9 назв.)

Ключевые слова: инфракрасная спектроскопия, щелочной алюмосиликат, пегматит, ИК-Фурье спектрометр, спектр поглощения тетраэдров, диапазоны валентных колебаний, изоморфизм групп $[\text{SiO}_4]$ и $[\text{AlO}_4]$, отрицательный заряд.

Проблема и её связь с научными и практическими задачами: По традиционной технологии внепечной обработки электростали в составе смеси твердых шлакообразующих материалов (ТШМ), как на ООО «МЗ «Днепросталь», так и других отечественных и зарубежных заводах, в основном используется плавиковый шпат (природный минерал флюорит CaF_2). В Украине из-за отсутствия разрабатываемого месторождения плавикового шпата для внепечной обработки стали применяется дорогой импортный плавиковый шпат.

Поэтому проблема работы состоит в создании научных физико-химических предпосылок для совершенствования технологии внепечной обработки стали с заменой импортного плавикового шпата пегматитом, запасы которого в недрах Украины практически не ограничены.

Для научного обоснования механизма и термокинетики ассимиляции пегматита различных фракций формирующимся в ковше шлаком необходимо изучить особенности микроструктуры пегматитслагающих минералов с учетом изоморфного замещения кристаллохимических групп $[\text{SiO}_4]$ группами $[\text{AlO}_4]$ с нейтрализацией изоморфных силикатных структур одновалентными ионами щелочных металлов, например натрия Na^+ и калия K^+ .

Изложение основного материала и результатов исследования

1. Характеристика тетраэдрического комплексного аниона $[\text{SiO}_4]^{4-}$ в обычных силикатных структурах

Основной единицей силикатных структур является группа $[\text{SiO}_4]$, представляющая собой тетраэдрическую координацию четырех атомов кислорода ($r_{\text{O}^{2-}} = 0,132 \text{ нм}$) со способностью катиона кремния Si^{4+} ($r_{\text{Si}^{4+}} = 0,039 \text{ нм}$) войти в эту координацию с образованием аниона $[\text{SiO}_4]^{4-}$. Стереометрическая единица группы $[\text{SiO}_4]$ является основой всех обычных силикатных структур [1; 2]. В. Л. Брегг [3] развил основные принципы управления способами соединения этих групп друг с другом в сложных силикатных

структурах. Рентгеноструктурные исследования, выполненные в 30-х годах прошлого века, показали, что два тетраэдра $[\text{SiO}_4]$ могут объединиться в комплексную группу $[\text{Si}_2\text{O}_7]^{6-}$ с помощью образования общего аниона кислорода («мостика») в одной из вершин.

Как следует из приведенных на рис. 1 способов соединения тетраэдров $[\text{SiO}_4]$, аналогично тетраэдры $[\text{SiO}_4]$ могут образовать кольцеобразный комплексный анион $[\text{Si}_3\text{O}_9]^{6-}$ с тремя мостиками.

Анионы $[\text{Si}_3\text{O}_9]^{6-}$ составлены из четырех и шести тетраэдров $[\text{SiO}_4]$, анионы $[\text{Si}_4\text{O}_{12}]^{8-}$ и $[\text{Si}_6\text{O}_{18}]^{12-}$ образуются подобным способом. По данным В. Эйтеля [1], во всех силикатных структурах ионы кислорода как компоненты играют важную роль, образуя «шаровую упаковку» весьма большой плотности, в промежутках которой могут располагаться катионы меньших размеров в соответствии с правилами кристаллографии (рис. 2).

2. Изоморфизм в ионных кристаллических структурах силикатов

Научные представления о природе изоморфизма, от классических исследований и определения «изоморфные кристаллы» [1], претерпе-

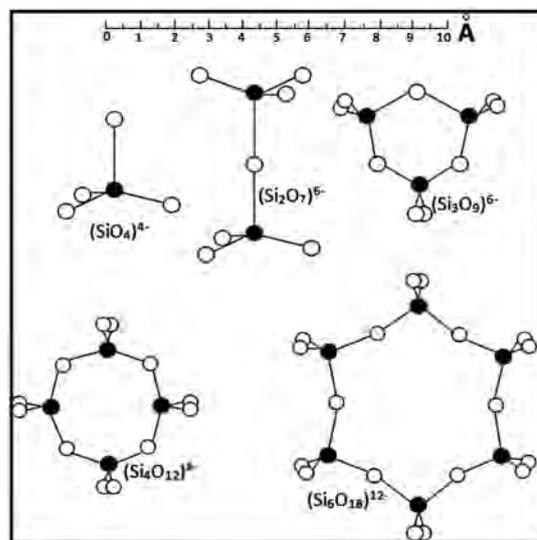


Рис. 1. Способы соединения тетраэдров $[\text{SiO}_4]$ в комплексы [3]

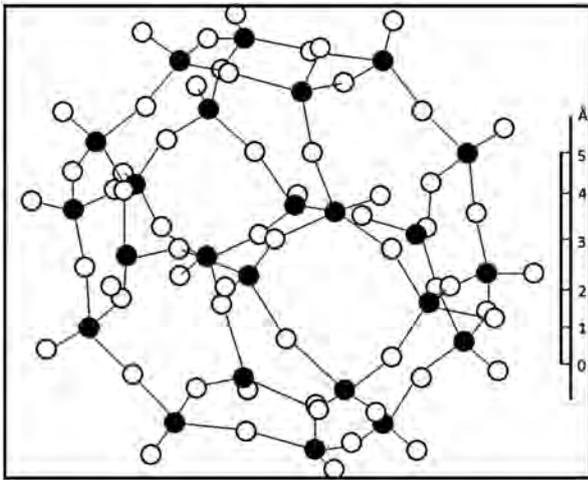


Рис. 2. Изотермический каркас в структуре природных силикатов

ли ряд принципиальных изменений. На ранних порах под термином «изоморфные кристаллы» подразумевались кристаллы с одинаковым морфологическим развитием («равное число атомов, соединенных друг с другом одинаковым образом»). Со временем это определение термина было пересмотрено, главным образом в части определения «химической аналогии» в химсоставах изоморфных кристаллов. В. Эйтель в фундаментальном труде «Физическая химия силикатов» [1] указывает, что В. М. Гольдшмидт [4] установил закон, согласно которому в ионных кристаллических структурах, к которым относится также силикаты, не величины валентностей решают вопрос о возможности изоморфизма, а ионные радиусы (табл. 1) и их отношения, а также поляризующее действие ионов на соседние с ним ионы.

Таблица 1

Значения ионных радиусов (элементов) входящих в состав пегматита, нм [4]

K ⁺	O ²⁻	Na ⁺	Mg ²⁺	Al ³⁺	Si ⁴⁺
0,133	0,132	0,98	0,78	0,57	0,39

Из этих данных следует, что ионы Si⁴⁺ и Al³⁺ смогут вступать в изоморфное замещение в ионных кристаллических структурах силикатов, следует полагать, в том числе, и в щелочных алюмосиликатах (пегматите). Тетраэдрическая координация при изоморфном замещении возможна, когда катион, участвующий в ней, сравнительно малого размера. Вследствие замещения тетраэдров [SiO₄] группам [AlO₄] образуется трехмерная сетка [(Si, Al)O₄] с отрицательным зарядом по каждой структурной единице. Следует обратить внимание на невозможность замещения групп [SiO₄] группами [CaO₄], хотя в работах 1930-х годов предлагалось это замещение.

На основе кристаллохимических законов В. М. Гольдшмидта [4] и по величине отношения

вычисленного им ионного радиуса алюминия к радиусу кислорода ($r_{Al}:r_O=0,57:1,3=0,438$) алюминий стоит на границе между пространственными условиями для тетраэдрической и октаэдрической координации. Алюминий может также образовывать октаэдрические группы [AlO₆], которые встречаются в некоторых силикатных структурах. Соединение последнего типа с группами [AlO₆] называются «алюминиевыми силикатами» (минералы кианит, андалузит, силлиманит, имеющие формулу (Al₂[SiO₄]), и муллита (3Al₂O₃ · 2SiO₂) [1].

Исследование зависимости между типом структуры и инфракрасным спектром показало, что сходство групп [SiO₄] и [AlO₄] в алюмосиликатах настолько велико, что индивидуальные частоты группы [AlO₄] близки к частотам группы [SiO₄]. Поскольку в структурах щелочноземельных алюмосиликатов присутствуют одновалентные ионы натрия и калия, представляет теоретический и технологический интерес исследовать кристаллохимическую структуру пегматита методом ИК-спектроскопии.

3. Основные закономерности поглощения электромагнитного излучения силикатами методом инфракрасной спектроскопии

ИК-спектроскопия представляет собой раздел молекулярной оптической спектроскопии, изучающий спектры поглощения и отражения электромагнитного излучения в ИК-области, т. е. диапазоне длин волн от 10⁻⁶ до 10⁻³ м в координатах интенсивности поглощения излучения – длина волны (или волновое число). ИК-спектры представляют собой сложную кривую с большим числом максимумов и минимумов. Полосы поглощения появляются в результате переходов между колебательными уровнями основного электромагнитного состояния излучаемой системы.

ИК-спектроскопия основана на трех законах.

1. Закон Бугера – Ламберта, сущность которого состоит в следующем. Если среда однородна и слой вещества перпендикулярен падающему параллельному световому потоку, то $I=I_0 \exp(-kd)$, где I₀ и I – интенсивности, соответственно падающего, и прошедшего через вещество света, d – толщина слоя, k – коэффициент поглощения, который не зависит от толщины поглощения слоя и интенсивности падающего излучения. Для характеристики поглощательной способности вещества широко используют коэффициент экстинкции или светопоглощения $k=k/2,303$ (см⁻¹) и плотность $A=\lg I_0/I$, а также величину пропускания $T=I/I_0$. Коэффициент k зависит от длины волны падающего света, т. к. его величина определена электронной конфигурацией молекул и атомов и вероятностью

переходов между их электронными уровнями. Совокупность переходов создает спектр поглощения (абсорбции), характерный для данного вещества.

2. Закон Бера. Согласно закону Бера, каждая молекула или атом, независимо от относительного расположения других молекул или атомов, поглощает одну и ту же долю энергии излучения, т. е. $k = \epsilon c$, где c – концентрация вещества. Важно отметить, что отклонение от закона Бера свидетельствует об образовании димеров, полимеров, ассоциатов, а также о химическом взаимодействии поглощающих частиц.

3. На основе объединения законов Бугера – Ламберта и Бера физиками получен объединительный закон Бугера – Ламберта – Бера.

$$I = I_0 \exp(-\epsilon cd).$$

Спектр вещества в конденсированной фазе определяется не только природой составляющих его молекул, но и межмолекулярными взаимодействиями, влияющих на структуру электронных уровней. Поэтому при анализе спектрограммы поглощения электромагнитного излучения щелочным алюмосиликатом следует учитывать, что такой спектр состоит из ряда широких полос различной интенсивности. Иногда в спектре проявляется структура колебательных уровней.

4. Экспериментальное определение ИК-спектров поглощения электромагнитного излучения елисеевским пегматитом с использованием ИК-Фурье спектрометра

Для экспериментального получения ИК-спектров поглощения электромагнитного излучения используют классические спектрометры и ИК-Фурье спектрометры. Достоинством классических ИК-спектрометров является простота конструкции, относительная дешевизна, вместе с тем они имеют ряд недостатков. В настоящей работе эксперименты проведены с использованием Фурье-спектрометра. В связи с этим ниже приведена краткая особенность Фурье-спектрометров в сравнении с классическими ИК-спектрометрами [6]. Прежде всего в Фурье-спектрометрах отсутствуют входная и выходная щели, а основным элементом является интерферометр. Для получения спектра в обычной форме производится соответствующее Фурье-преобразование с помощью встроенной ЭВМ [5]. Необходимый этап ИК-спектроскопических исследований с использованием Фурье-спектрометров – интерпретация спектров, т. е. установление формы нормальных колебаний, распре-

деление колебательной энергии по степеням свободы, выделение значимых параметров, определяющих положение полос в спектрах и их интенсивность [7; 8].

Краткая характеристика ИК-Фурье спектрометра Nicolet iS10

ИК-Фурье спектрометр Nicolet iS10¹ (производитель Thermo, США) как средство измерения характеризуется надежным многофункциональным спектрометром для исследовательских задач, простотой использования, наличием оптической системы, встроенными стандартами для валидации по ASTM E1421, программным обеспечением (русифицированная программа для управления спектрометром, новейший пакет для идентификации смесей по библиотекам спектров высокого разрешения) и пр.

Спектральный диапазон волновых чисел 7800-350 см⁻¹, максимальное спектральное разрешение: 0,4 см⁻¹, динамическая настройка интерферометра в автоматическом режиме при помощи программного обеспечения, благодаря чему достигается высокая стабильность работы спектрометра и высокое качество результатов.

5. Характеристика образцов пегматита для ИК-спектрального исследования

Представительные образцы пегматита Елисеевского месторождения были отобраны от тоннажной партии, предназначенной для использования в составе ТШМ при внепечной обработке электростали с заменой им плавикового шпата. Согласно действующим ТУ У 14.5-22141286-001-2002 товарный пегматит должен иметь следующий валовой химсостав, % мас.: Fe₂O₃ не более 1,5%, сумма %K₂O+%Na₂O не менее 6%, содержание SiO₂ не регламентируется, потери при прокаливании не более 2%, массовая доля свободного кварца не регламентируется (хотя обычно составляет 30-35%), количество Al₂O₃ не менее 9%, сумма %CaO+%MgO не должна превышать 2%. ИК-спектрометрическим исследованиям предшествовало определение химсостава образца пегматита в центре сертификационных испытаний цветных металлов, стандартных образцов и метрологического обеспечения аналитического контроля, свидетельство об аттестации № 3813-85 ВЛ, дата регистрации 01.07.2013 г. (табл. 2)

Таблица 2

Результаты анализа пегматита (% мас.)

SiO ₂	Al ₂ O ₃	CaO	MgO	Fe ₂ O ₃	K ₂ O	Na ₂ O
75,2	13,2	1,21	1,1	0,6	2,1	6,1

¹Спектрометр ИК-Фурье Nicolet iS10 – лабораторное оборудование – Харьков, Украина (<http://labanalyt.com/0/spektrometryi/spektrometr-ik-fure-nicolet-is10-2.html>).

Результаты регистрации ИК-спектров и анализа ИК-спектрограмм

ИК-спектры образца пегматита получены на ИК-Фурье спектрометре Nicolet iS10. ИК-спектры регистрировались в режиме диффузного рассеяния в среднем ИК-диапазоне, как отмечено выше, спектральный диапазон волновых чисел $350\text{--}7800\text{ см}^{-1}$. Так как интенсивность поглощения (отражения) в этих пределах неравномерна, для наглядности выделены два диапазона волновых чисел (волн) $600\text{--}1\ 800\text{ см}^{-1}$ (рис. 3) и $2\ 600\text{--}3\ 800\text{ см}^{-1}$ (рис. 4). В связи с этим зарегистрированные ИК-спектры представлены в виде двух соответствующих графических зависимостей и полных ИК-спектров в табличном виде.

В ИК-спектрах представленных образцов пегматитов преобладают интенсивные полосы, характерные для вибраций кремнекислородных тетраэдров SiO_4 силикатов с присущим им многообразием кристаллических мотивов и концевых групп.

Самая интенсивная расщепленная полоса $1250\text{--}1350\text{ см}^{-1}$, очевидно, соответствует сильно смещенным в коротковолновую область валентным асимметричными колебаниям мостиковых $\text{Si} - \text{O} - \text{Si}$ связей. Симметричные валентные колебания этих же групп лежат в диапазоне $737,37\text{--}799,00\text{ см}^{-1}$.

С одной стороны, к такому большому сдвигу до 200 см^{-1} может приводить полимеризация кремнекислородных мотивов. Чем выше степень полимеризации кислородных радикалов SiO_4 , тем сильнее область максимального поглощения сдвинута к более высоким частотам пропорционально возрастающему отношению $\text{Si}:\text{O}$. Такая структура характерна для каркасных силикатов: кварцев, полевых шпатов и т. п. С другой стороны, изоморфное замещение катионов Fe^{2+} , Al^{3+} на Fe^{3+} в октаэдрических позициях слоистых силикатов также может приводить к частотному сдвигу в том же направлении.

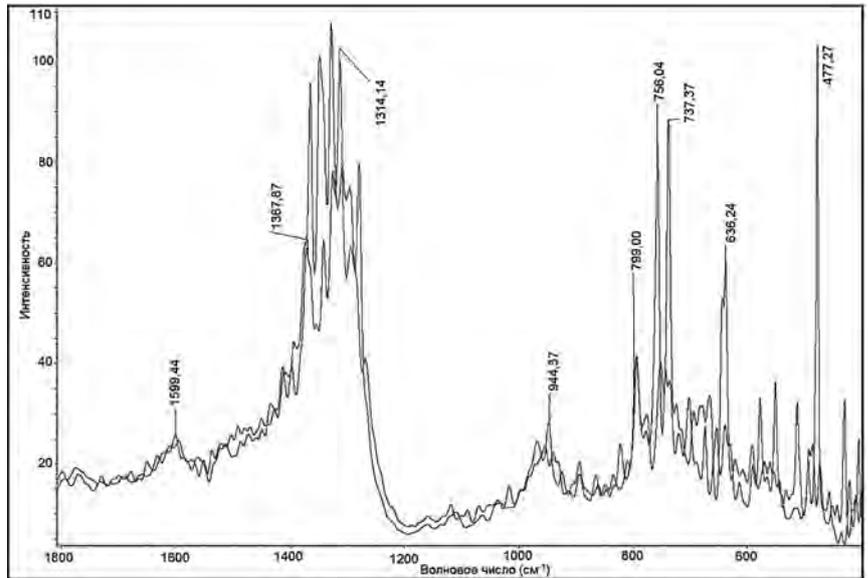


Рис. 3. ИК-спектры поглощения электромагнитного излучения щелочного алюмосиликата пегматитом в интервале волновых чисел $600\text{--}1800\text{ см}^{-1}$



Рис. 4. ИК-спектры поглощения электромагнитного излучения щелочного алюмосиликата пегматитом в интервале волновых чисел $2600\text{--}3800\text{ см}^{-1}$

Пик 950 см^{-1} может относиться либо к валентным колебаниям группы $\text{Si} - \text{O} - \text{Al}$, где алюминий входит в анионный радикал, либо к асимметричным валентным колебаниям концевых групп $\text{O} - \text{Si} - \text{O}$ (или $-\text{O} - \text{Si} - \text{O}-$). В этой же области ИК-спектрограммы находятся свободные деформационные колебания концевых сигнальных групп, валентные колебания которых наблюдаются также в виде двух слабых пиков $3699,01\text{ см}^{-1}$ и $3625,55\text{ см}^{-1}$.

Выводы

1. Выполнен анализ информационного ресурса данных о кристаллохимической структуре щелочных алюмосиликатов относительно природного щелочного шпата пегматита как перспективного сырьевого материала для решения проблемных задач горно-металлургического комплекса Украины

стратегического импортного замещения плавикового шпата (флюорита) более эффективным в составах твердых шлакообразующих материалов для внепечной обработки металла-полупродукта при выпуске его из печи в ковш и рафинировании на установке ковш-печь.

2. В ходе проведенного аналитического исследования литературных данных выявлено, что основной единицей силикатных структур является группа $[\text{SiO}_4]$, представляющая собой тетраэдрическую координацию четырех атомов кислорода и одного атома кремния. Эти группы могут объединяться в комплексные группы, состоящие из четырех и шести тетраэдров $[\text{SiO}_4]$, образуя анионы $[\text{Si}_3\text{O}_9]^{6-}$. Подобным образом могут образовываться и более сложные тетраэдрические структуры $[\text{Si}_4\text{O}_{12}]^{8-}$ и $[\text{Si}_6\text{O}_{18}]^{12-}$.

3. В алюмосиликатных структурах возможно изоморфное замещение групп $[\text{SiO}_4]$ группами $[\text{AlO}_4]$ с образованием трехмерной сетки $[(\text{Si}, \text{Al})\text{O}_4]$ с отрицательным зарядом по каждой структурной единице. Нейтральность тетраэдрических групп достигается наличием в них одновалентных катионов щелочных металлов, например Na^{1+} .

4. Выполненные ИК-спектроскопические экспериментальные исследования елисеевского пегматита – представителя щелочных алюмосиликатов позволили по наличию на ИК-спектрограмме экстремума (пика интенсивностью 950 см^{-1}), относящегося к валентным колебаниям изоморфно замещающей группы $-\text{O}-\text{Al}-$, в которой алюминий входит в анионный радикал $[(\text{Si}, \text{Al})\text{O}_4]^{n-}$, идентифицировать пики, принадлежащие колебаниям других групп.

5. К сопутствующему изоморфизму относится связь между физическими свойствами кристаллических растворов и их химическими свойствами [1]. На тройной диаграмме состояния системы $\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{Na}_2$ елисеевский пегматит, за вычетом свободного кварца, имеет химсостав состав, который расположен в концентрационной области с температурой плавления $900-1100\text{ }^\circ\text{C}$. Опытнo-промышленные плавки по внепечной обработке электростали ТШМ с замещением импортного плавикового шпата елисеевским пегматитом подтверждают высокую текучесть сформированных с пегматитом шлаков и нормируемую степень десульфурации стали.

6. Учитывая эффективность опытно-промышленного освоения внепечной обработки электростали с применением пегматита, разработанная инновационная технология с замещением импортного плавикового шпата пегматитом имеет одно из приоритетных направлений совершенствования сквозной технологии производства электростали.

Библиографический список / References

1. Эйтель В. Физическая химия силикатов / В. Эйтель. – М.: Изд-во иностранной литературы, 1962. – 1054 с.
Eitel V. *Fizicheskaya khimiya silikatov*. Moscow, Izdatel'stvo inostrannoy literatury. 1962, 1054 p.
2. Ферсман А. Е. Избранные труды. Т. III / А. Е. Ферсман. – М.: Изд-во АН СССР, 1955.
Fersman A. Ye. *Izbrannyye trudy*. Vol. III. Moscow, Izdatel'stvo ANSSSR. 1955.
3. Брегг В. Л. Структура силикатов / В. Л. Брегг // Основные идеи геохимии. Вып. III. – М.: ОНТИ, 1937.
Bregg V. L. *Struktura silikatov*. *Osnovnyye idei geokhimi*. Issue III. Moscow, ONTI. 1937.
4. Гольдшмидт В. М. Геохимические законы / В. М. Гольдшмидт. VII. 1926.
Gol'dshmidt V. M. *Geokhimicheskiye zakony*. VII. 1926.
5. Грибов Л. А. Инфракрасная спектроскопия / Л. А. Грибов // Химическая энциклопедия. – М.: Изд-во «Советская энциклопедия», 1990. – Т. 2. – С. 250–251.
Gribov L. A. *Infrakrasnaya spektroskopiya* *Khimicheskaya entsiklopediya*. Moscow, Izd-vo "Sovetskaya entsiklopediya". 1990, vol. 2, pp. 250-251.
6. Ярославский Н. Г. Методика и аппаратура длинноволновой инфракрасной спектроскопии / Н. Г. Ярославский // Успехи физической науки. – 1957. – Т. 62, вып. 2. – С. 259 с.
Yaroslavskiy N. G. *Metodika i apparatura dlinnovolnovoy infrakrasnoy spektroskopii*. *Uspekhi fizicheskoy nauki*. 1957, vol. 62, issue 2, 259 p.
7. Кросс А. В. Введение в практическую инфракрасную электроскопе: пер. с англ / А. В. Кросс. – М., 1961.
Kross A. V. *Vvedeniye v prakticheskuyu infrakrasnyuyu elektroskope*. Moscow, 1961.
8. Физический энциклопедический словарь / главный редактор А. М. Прохоров. – М.: Советская энциклопедия, 1983. – С. 60.
Prokhorov A. M. (ed.) *Fizicheskiiyentsiklopedicheskiy slovar'*. Moscow, Sovetskaya entsiklopediya, 1983, p. 60.
9. Гасик М. И. Опытнo-промышленное освоение импортозамещающей технологии внепечного рафинирования электростали трубного сортамента в условиях ООО «МЗ «Днепросталь» / М. И. Гасик, Ю. С. Пройдак, А. П. Горобец, Г. А. Есаулов, Ю. В. Климчик // *Металлургическая и горнорудная промышленность*. – 2017. – № 2. – С. 15–20.
Gasik M. I., Yesaulov G. A., Projdak Yu. S., Gorobets A. P., Klimchik Y. V. *Experimental and industrial mastering of import-substituting technology of secondary refining of EAF steel at MP Dneprosteel LLC*. *Metallurgical and mining industry*, 2017, no. 2, pp. 15-20.

Purpose. Analysis of the information resource of the data on the composition and properties of alkali aluminosilicates and the experimental study of the mineral composition of the crystallochemical structure and fusibility of pegmatite, as a natural raw material used for secondary processing of electric steel in the composition of Solid slag forming materials (SSFM) in place of imported fluorspar.

Methodology. The analytical part of the study includes the method of generalization and analysis of literature data on the crystal structures and properties of alkali aluminosilicates, and the experimental procedure is a logical continuation of the stated target, namely: infrared spectroscopy recording by is-spectra on a spectrometer Nicolet iS10 with software and operating system.

Findings. Received and analyzed IS-spectrograms of electromagnetic radiation absorption of the pegmatite of the Eliseevskoye deposit, representing complex curves in the coordinates “absorption intensity – wave numbers” with a large number of maxima. The results are processed in an automatic mode on the is-spectrometer with the help of software and are of great scientific and practical interest.

Originality. In the is-spectra of the Eliseevsky pegmatite the prevailing intense bands, characteristic tetrahedra SiO_4 silicates, were obtained for the first time. A large shift in the range of symmetric stretching vibrations of Si-O-Si bridging bonds confirms the polymerization of oxygen motifs, which is characteristic of skeletal silicates: quartz, feldspar, etc. The peak (extremum) 950 cm^{-1} belongs primarily to the stretching vibrations of Si-O-Al, where aluminum enters the anionic radical. As a result of the isomorphous substitution of the

groups $[\text{SiO}_4]$ by the groups $[\text{AlO}_4]$, the $[\text{SiO}_2]$ carcasses are converted into the skeletons of aluminosilicates, adding an additional negative charge to the structure unit. The alkali metal ions contained in the pegmatite, for example, Na^+ , enter with one ion Al^{3+} and neutralize the structure as a whole. Along with these results, absorption bands corresponding to stretching vibrations of the -O-Si-O- terminal groups, free deformation vibration of the end silanol groups, were obtained and analyzed. The valent vibrations of the hydroxides of water molecules on the surface are represented on the IR spectrogram by a diffuse peak.

Practical value. The results of the experimental study, their generalization and analysis in combination with the information resource on IR spectroscopy (vibrational and absorption spectra of electromagnetic radiation) were used in the development of the mechanism and thermokinetics of pegmatite assimilation by highly basic slags during the development of an innovative technology for secondary processing of electric steel with substitution of imported fluorspar for domestic Raw material – alkaline aluminosilicate Eliseevsky pegmatite.

Key words: infrared spectroscopy, alkali aluminosilicate, pegmatite, IR Fourier spectrometer, tetrahedron absorption spectrum, valence vibration bands, $[\text{SiO}_4]$ and $[\text{AlO}_4]$ group isomorphism, negative charge.

Рекомендована к публикации
д. т. н. М. И. Гасиком

Поступила 22.05.2017

